不適切な問題に対する適用可能な数値解法の検討(工学に現れる偏微分方程式の数値解析とその周辺)

AUTHOR(S):

今井, 仁司; 周, 偉東; 河原田, 秀夫; 沢栗, 利男; 名取, 亮

CITATION:

今井, 仁司 ...[et al]. 不適切な問題に対する適用可能な数値解法の検討(工学に現れる偏微分方程式の数値解析とその周辺). 数理解析研究所講究録 1993, 836: 102-112

ISSUE DATE:

1993-05

URL:

http://hdl.handle.net/2433/83473

数理解析研究所講究録
836巻 1993年 102-112

不適切な問題に対する適用可能な数値解法の検討

筑波大学電子・情報工学系 今井 仁司 (Hitoshi IMAI)
筑波大学工学研究科 周 偉東 (ZHOU Weidong)
千葉大学工学部 河原田 秀夫 (Hideo KAWARADA)
千葉大学工学部 沢栗 利男 (Toshio SAWAGURI)
筑波大学電子・情報工学系 名取 亮 (Makoto NATORI)

1. 序

相分離の現象（図1参照）は，物理現象として興味ある現象であるばかりか，数学的にも解の安定性が問題になる興味深い現象である．また，工学的にも製品の劣化問題に絡んでくる重要な問題である．ここではスピノーダル分解[2,3,9]と呼ばれる相分離現象を考える．これを記述する方程式が Cahn-Hilliard方程式と呼ばれる一連の方程式群である．これらの方程式を解析的に解くことは現実的には不可能であるため，その数値シミュレーション[1] は重要になる．ここではつぎの方程式を考えることにする[8].

$$c_t = \nabla\cdot(U(c)\nabla c), \quad U(c) = \alpha_1 - \alpha_2 c(1-c),$$

ここでα_1，α_2は定数で，cは例えば二つの原子からなる混晶の一方の原子の組成を表す．この方程式に斉次ノイマン境界条件を付加すると，cを領域で積分したもの（原子の総量）は時間的に保存され，しかもこの系の物理的なエネルギーは時間的に減少する[9]． したがって，上の方程式は物理的には考える価値があるように見える．

この方程式は，一見通常の熱伝導方程式に見えるが，拡散係数U（c）が必ずしも正になるとは限らないため不適切な方程式となり，その数値計算はきわめて困難なものになる．誤差が指数関数的に増大するのである．ここではこのような不適切な方程式にある程度適用可能な数値解法の検討を行う．その場合，解の一意性がなければ数値解の評価を行うことは無意味となるが，実用問題のかなり広範囲の方程式に対して解の一意性はあるようである[5,11].

このような不適切な方程式を解くことは，逆問題と呼ばれる分野の問題で，工学的には避けて通れないものである．逆問題の典型的なものに，通常の熱方程式を時間に逆行して解くものがある．それはこの問題では拡散係数U（c）が恒等的に負である場合に相当する．その場合の数値解法はいくつか考えられている[4]が， 拡散係数の正負がわからないいまの問題に適用可能かどうかわからない．汎用的で現在最も有効である方法は解適合格子法[7] であるかも知れない．しか

しながら解適合格子は複雑な方法であり任意性がありすぎる．そこで，ここでは比較的簡単なある程度適応しうる数値解法を見いだすことを試みる．ただし，数値的安定性を確保するために人工粘性項を付加する方法は考慮しないことにする．人工粘性項が明確な物理的意味（例えば４階微分の項は界面エネルギーを表す）をもつために，方程式が表す物理現象とシミュレーション結果が対応しなくなってしまうためである．

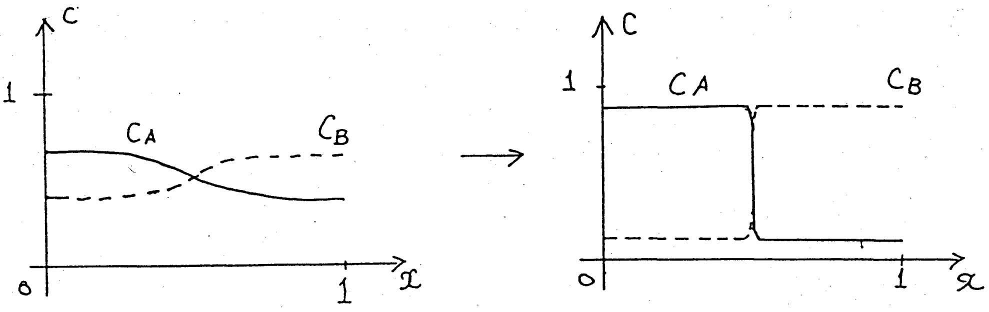

図１　スピノーダル分解

２．比較に用いた数値解法と熱伝導方程式への適用結果

非線形で解の存在もわからないようなCahn-Hilliard方程式に対して，数値解法の比較検討を行うのは無意味であるので，ここではつぎの単純な熱伝導方程式で比較する．

$$u_t = \kappa\ u_{xx} \quad \text{in } (-1, 1).$$

ここで，κは定数と仮定する．境界条件は斉次ディリクレ条件を用い，初期条件は cos 関数を平行移動したものを用いる．厳密解は

$$u(t, x) = \frac{a_0}{2} + a_1 e^{-\left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \kappa t} \cos\left(\frac{\pi}{2} x\right)$$

で与えられる．ただし，a_0, a_1 は初期条件で与えられた定数．

数値計算における空間に関する離散化としては，差分法（中心差分）と有限要素法，スペクトル法（Fourier-Galerkin法，Chebyshev-Collocation法[4]）を比較する．空間離散化で得られる，時間に関する常微分方程式の数値解法として

は，よく用いられる陽解法（オイラー法），陰解法（後退オイラー法，台形法，2次ギアー法）を比較する[8].

熱拡散係数 $\kappa = 1$ とした通常の問題に対して数値計算を行ってみた．相対誤差

$$\frac{\max_i |u_i(t) - u(t,x_i)|}{\max_i |u(t,x_i)|}$$

を表1，2に示す．陰解法の連立1次方程式の解法にはGauss の消去法を用いた．

表1　時刻 t=1.0 における相対誤差（κ=1，時間増分:0.02，空間分割:20，モード数:20 ）

	前進オイラー	後退オイラー	台形則	2次ギアー
FDM	0.15E+27	0.66E-01	0.46E-02	0.11E-02
FEM	0.60E+52	0.56E-01	0.56E-02	0.90E-02
C-C	0.31E+95	0.61E-01	0.50E-03	0.20E-02
F-G	0.61E-01	-----	0.50E-03	-----

表2　時刻 t=1.0 における相対誤差（κ=1，時間増分:0.002，空間分割:20，モード数:20 ）

	前進オイラー	後退オイラー	台形則	2次ギアー
FDM	0.10E-02	0.11E-01	0.51E-02	0.51E-02
FEM	0.44E+51	0.10E-02	0.51E-02	0.51E-02
C-C	1.00E+300<	0.61E-02	0.50E-05	0.23E-05
F-G	0.61E-02	-----	0.50E-05	-----

ここで，FDM，FEM，C-C，F-Gはそれぞれ差分法，有限要素法，Chebyshev-Collocation 法，Fourier-Galerkin法を示す． 前進オイラー法だけが安定条件の問題から不安定になっているが，他の方法は安定に精度よく計算できていることがわかる．有限要素法は質量行列を集中化してないので，前進オイラー法における安定性が差分法より悪くなっている．Chebyshev-Collocation 法の前進オイラー法における安定性はさらに悪いようである．ただし，陰解法においてはスペクトル法の精度がいちばん良い．

つぎに，熱拡散係数 $\kappa = -1$（異常熱拡散問題）として数値計算を行ってみた．この場合は相対誤差が指数関数的に増えてくる．経験的にいって相対誤差が１０％を越えるとすぐ発散する．そこでここには，相対誤差が１０％を越た時刻を示す．

表３　相対誤差が１０％を越た時刻（κ= -1，時間増分:0.02，空間分割:20，モード数:20 ）

	前進オイラー	後退オイラー	台形則	２次ギアー
FDM	0.34	0.42	0.24	0.30
FEM	0.24	0.44	0.20	0.38
C-C	0.14	0.46	0.24	0.34
F-G	1.02<	-----	1.02<	-----

表４　相対誤差が１０％を越た時刻（κ= -1，時間増分:0.002，空間分割:20，モード数:20 ）

	前進オイラー	後退オイラー	台形則	２次ギアー
FDM	0.14	0.06	0.10	0.08
FEM	0.08	0.04	0.02	0.04
C-C	0.04	0.06	0.04	0.04
F-G	1.02<	-----	1.02<	-----

Fourier-Galerkin法以外は優劣付け難い．ではFourier-Galerkin法がなぜよいかというと，Fourier-Galerkin法の基底を用いるとこの問題の解が属する空間の次元が有限になり，またそれぞれの基底間の干渉がないためである．これは問題が線形であることに本質的に依存する．線形である場合には，空間微分の作用素の固有関数を用いるとよいという例が報告されている[5] が，いまの計算結果はそれに対応するものであると思われる．しかしながら空間微分の作用素の固有関数を基底にとる方法も，問題が非線形になると適用が難しくなる．

異常拡散問題のような場合には，誤差が高次モードまで伝播し，それが増幅されるため爆発的な振動が起こる．したがって，高次モードの励起を少し抑えてやれば結果は改善されるかも知れない．ところが，陰解法の連立１次方程式の解法に用いているGauss の消去法にはそのような制御パラメータはない．そこで，いま注目されている Bi-CGSTAB[10]を連立１次方程式の解法に用いてみた．Bi-CGSTAB の収束特性[6] から高次モードの励起を抑える効果があるのではないかと期待したからである．

表５　Chebyshev-Collocation 法でBi-CGSTABを用いて時間積分したときの時刻 t=1.0 における相対誤差（κ = 1, 空間分割:20 ）

dt	前進オイラー	後退オイラー	台形則	２次ギアー
0.02	----	0.61E-01	0.50E-03	----
0.002	----	0.61E-02	0.50E-05	----

表６　Chebyshev-Collocation 法でBi-CGSTABを用いて時間積分したときの相対誤差が１０％を越た時刻（κ = -1, 空間分割:20 ）

dt	前進オイラー	後退オイラー	台形則	２次ギアー
0.02	----	0.58	0.34	----
0.002	----	0.06	0.02	----

時間刻み巾 dt=0.02 の場合はほんの少しは改善されたようである．

以上の計算結果から，とりあえずFourier-Galerkin法でCahn-Hilliard 方程式の数値計算を行うことにする．

3. Cahn-Hilliard 方程式の数値計算結果

Cahn-Hilliard 方程式で，$\alpha_1 = 1.0$，$\alpha_2 = 5.0$ とし，ノイマン境界条件で，sin 関数の平行移動したものを初期条件（図７）としてFourier-Galerkin法で数値計算を行った．

<u>係数</u>

```
 a(0) =  0.1000000000D+01,      a(2) =  0.0,
 a(1) =  0.1000000000D+00,      a(3) =  0.0.
```

<u>形状</u>

```
                  min = 0.40000D+00,   max = 0.60000D+00
 0 I                                    *                         I  0
 1 I                                    *                         I  1
 2 I                                    *                         I  2
 3 I                                    *                         I  3
 4 I                                   *                          I  4
 5 I                                   *                          I  5
 6 I                                  *                           I  6
 7 I                                 *                            I  7
 8 I                                *                             I  8
 9 I                               *                              I  9
10 I                              *                               I 10
11 I                             *                                I 11
12 I                            *                                 I 12
13 I                           *                                  I 13
14 I                          *                                   I 14
15 I                         *                                    I 15
16 I                         *                                    I 16
17 I                        *                                     I 17
18 I                        *                                     I 18
19 I                        *                                     I 19
20 I                        *                                     I 20
```

図７　初期条件．

<u>係数</u>

```
 a(0) =  0.1000000000D+01,      a(2) =  0.0
 a(1) =  0.1319566947D+00,      a(3) = -0.2300556712D-01
```

<u>形状</u>

```
        time = 0.12,   min =  0.38602D+00,   max =  0.61398D+00
 0 I                                     *                        I  0
 1 I                                     *                        I  1
 2 I                                     *                        I  2
 3 I                                     *                        I  3
 4 I                                     *                        I  4
 5 I                                     *                        I  5
 6 I                                    *                         I  6
 7 I                                   *                          I  7
```

```
 8 I                                   *                            I  8
 9 I                                 *                              I  9
10 I                               *                                I 10
11 I                             *                                  I 11
12 I                           *                                    I 12
13 I                          *                                     I 13
14 I                         *                                      I 14
15 I                        *                                       I 15
16 I                        *                                       I 16
17 I                        *                                       I 17
18 I                        *                                       I 18
19 I                        *                                       I 19
20 I                        *                                       I 20
```

図８　時刻 t = 0.12 における解の形状（時間増分 : 0.002）.

これ以後の時刻ではつぎのような振動が起こり始める.

係数

```
  a(0) =  0.1000000000D+01,       a(2) =  0.0
  a(1) =  0.1349912180D+00,       a(3) = -0.2855601702D-01
```

形状

```
        time = 0.13,    min =  0.38197D+00,    max = 0.61803D+00
 0 I                                      *                         I  0
 1 I                                      *                         I  1
 2 I                                      *                         I  2
 3 I                                      *                         I  3
 4 I                                       *                        I  4
 5 I                                      *                         I  5
 6 I                                      *                         I  6
 7 I                                     *                          I  7
 8 I                                   *                            I  8
 9 I                                 *                              I  9
10 I                               *                                I 10
11 I                             *                                  I 11
12 I                           *                                    I 12
13 I                         *                                      I 13
14 I                        *                                       I 14
15 I                        *                                       I 15
16 I                       *                                        I 16
17 I                        *                                       I 17
18 I                        *                                       I 18
19 I                        *                                       I 19
20 I                        *                                       I 20
```

係数

```
  a(0) =  0.1000000000D+01,       a(2) =  0.0
  a(1) =  0.1412360178D+00,       a(3) = -0.4312462891D-01
```

形状

```
        time = 0.15,    min =  0.36964D+00,    max =     0.63036D+00
```

```
 0 I                                      *                        I  0
 1 I                                      *                        I  1
 2 I                                       *                       I  2
 3 I                                        *                      I  3
 4 I                                        *                      I  4
 5 I                                        *                      I  5
 6 I                                        *                      I  6
 7 I                                       *                       I  7
 8 I                                     *                         I  8
 9 I                                   *                           I  9
10 I                                *                              I 10
11 I                             *                                 I 11
12 I                           *                                   I 12
13 I                         *                                     I 13
14 I                        *                                      I 14
15 I                        *                                      I 15
16 I                        *                                      I 16
17 I                        *                                      I 17
18 I                         *                                     I 18
19 I                          *                                    I 19
20 I                          *                                    I 20
```

係数

a(0) = 0.1000000000D+01,   a(2) = 0.0
a(1) = 0.1793009032D+00,   a(3) = -0.3208319838D+00

形状

```
         time = 0.30,   min =  0.89480D-01,   max =     0.91052D+00
 0 I                       *                                       I  0
 1 I                         *                                     I  1
 2 I                               *                               I  2
 3 I                                       *                       I  3
 4 I                                                *              I  4
 5 I                                                       *       I  5
 6 I                                                          *    I  6
 7 I                                                         *     I  7
 8 I                                                    *          I  8
 9 I                                           *                   I  9
10 I                                *                              I 10
11 I                     *                                         I 11
12 I            *                                                  I 12
13 I       *                                                       I 13
14 I      *                                                        I 14
15 I         *                                                     I 15
16 I                *                                              I 16
17 I                         *                                     I 17
18 I                                 *                             I 18
19 I                                       *                       I 19
20 I                                         *                     I 20
```

図9　解の形状（時間増分 : 0.002）. t=0.13 で振動が始まり，それが助長されている. t=0.30 では係数の大きさの単調性がなくなっている.

図9より，解の形状においてスロープの部分が十分急になる前に数値的に不安定になっているように見える. 係数の大きさを見ると，不安定性と高次モード

の係数の大きさの成長が関連していることがわかる．これはモード数が足りないために変化の激しい解をとらえきれず，その結果不安定になっているように思える．そこでモード数を倍にして計算を行ってみた．モード数を増やすとより早い時刻で不安定になってしまった．しかも解の形状も変化が爆発的になった．

以上のことから，安定に計算を行うには何らかの工夫が必要であることがわかる．そこで，ここではつぎのような原理にしたがったモード数と時間刻み幅の制御を行うことにする．

1) 陰解法において，反復法の回数が増えることはうまく解けてないことを示すので，そうなったら時間刻み幅を小さくすることにする．逆にうまくいってそうなら刻み巾を大きくしていく．

2) 時間刻み幅がある程度小さくなると，丸め誤差も影響してくるし計算時間もかかるだけであるし，なりよりもそのようになるのは必要なモード数が足りないためであると思われるので，モード数を増やすことにする．

このような制御を行って計算したのがつぎの例である．

<u>係数</u>

```
 time =      0.15000D+00

 a(0) =  0.1000000000D+01,       a(5) =  0.7624113336D-02
 a(1) =  0.1412116653D+00,       a(6) =  0.0
 a(2) =  0.0,                    a(7) = -0.1483484263D-02
 a(3) = -0.3133795590D-01,       a(8) =  0.0
 a(4) =  0.0,                    a(9) =  0.0
```

<u>形状</u>

```
         time =  0.15,    min =  0.38301D+00,   max =  0.61699D+00
  0 I                                      *                        I  0
  1 I                                      *                        I  1
  2 I                                      *                        I  2
  3 I                                      *                        I  3
  4 I                                      *                        I  4
  5 I                                      *                        I  5
  6 I                                      *                        I  6
  7 I                                     *                         I  7
  8 I                                    *                          I  8
  9 I                                  *                            I  9
 10 I                               *                               I 10
 11 I                            *                                  I 11
 12 I                          *                                    I 12
 13 I                         *                                     I 13
 14 I                        *                                      I 14
 15 I                        *                                      I 15
 16 I                        *                                      I 16
 17 I                        *                                      I 17
 18 I                        *                                      I 18
 19 I                        *                                      I 19
 20 I                        *                                      I 20
```

図１０　計算パラメータ制御を行った場合の解の形状．

計算パラメータの制御を行わない場合より少しは安定に計算できた．これ以後は急なモード増加が要求され，それに対処できなかったために計算が終了した．

4．まとめ

Cahn-Hilliard 方程式のような不適切な方程式に対して，ある程度適応しうる数値解法を見いだすために，いくつかの数値解法とくに差分法と有限要素法，スペクトル法を比較した．数値計算の結果，特別な計算スキームを採用するか，注意深い格子（および時間刻み巾）制御を行わない限り，有効でないことがわかった．今回は行わなかったが，wavelet を用いた方法の有効性を調べることは興味あるものである．

5．謝辞

スピノーダル分解という興味深い現象とそのモデル化を紹介してくださった東京大学工学部の恩田博士に感謝の意を表する．

参考文献

[1] H.W. Alt and I. Pawlow, Dynamics of Non-Isothermal Phase Separation, Int. Series of Nume. Math., Birkäuser Verlag Basel, 95(1990), 1-26.

[2] J.W. Cahn, On Spinodal Decomposition, Acta Metall., 9(1961), 795-801.

[3] J.W. Cahn, Spinodal Decomposition, Trans. Metall. Soc. AIME 242(1968), 166-180.

[4] C. Canuto et al., “Spectral Methods in Fluid Dynamics,” Springer, 1988.

[5] A. Carasso and A.P. Stone, “ Improperly posed boundary value problems,” Pitman, 1975.

[6] 張 紹良，藤野 清次，反復解法の収束特性と計算効率，情報処理学会研究報告，91-NA-37(1991)，91-98.

[7] R.M. Furzeland et al., A Numerical Study of Three Moving-Grid Methods for One-Dimensional Partial Differential Equations Which Are Based on the Method of Lines, J. Comput. Phys., 89(1990), 349-388.

[8] 名取 亮，数値解析とその応用，コノナ社，1990.

[9] 恩田 智彦，修士論文，東京大学，1985.

[10] H.A. Van der Vorst, Bi-CS STAB: A Fast and Smoothly Converging Variant of Bi-CG for the Solution of Nonsymmetric Linear Systems,

SIAM J. Sci. Stat. Compt. (to appear)

[11]M. Yamamoto, On the Stability of Solutions to Backward Semilinear Parabolic Equations with A Priori Bound, J-TOKYO-MATH, 91-15, Univ. Tokyo, 1991.